

ChemOS-DX 研究所活動実績報告書

「Chemical Optimization System – digital transformation」

令和5年4月1日～令和6年3月31日

令和6年4月26日

所長 武田和宏

1. 概要

2023年度も構成員とともに意欲的に研究を行い、多くの成果を発表した。2023年4月には科研費学術変革領域研究の研究代表者 大嶋孝志教授（九州大学）に来校いただき、共同研究打ち合わせを行った。また、2回の科研費報告会にて4名の構成員が報告した。研究成果として12件の国際会議と4件の国内会議を合わせて16件の学会発表を行った。2023年5月および12月に開催された国際会議では、武田和宏（所長）、間瀬暢之（研究分担者）、榎山儀恵（客員准教授）、大嶋孝志（客員教授）が研究成果を発表した。2023年9月に開催された学会で武田和宏（所長）が展望講演を行った。また、フロー型マイクロ波加熱反応器における出口成分測定のためのインライン赤外分光測定器 ReactIR をさらに活用するための環境を整備した。

さらに本プロジェクト客員教授を含む2件の共同研究を継続した。1件は機械学習による基質選択性認識触媒の検討を始めており、触媒構造による基質選択性を予測したうえで、その予測結果を用いた触媒構造の提案により論文としてアクセプトされた。本論文は当該雑誌のカバーに選定された。また、もう1件の共同研究としてハロゲン化反応の収率予測およびその予測結果を改善し、拡張するための実験条件選定を行った。ここで開発した手法は、通常では信頼性が低くなる外挿領域において高い信頼性で予測できるものであり、1件は論文としてアクセプトされた。さらに1件の論文を執筆中である。また、2024年4月にはグリーン科学研究所との合同セミナーを開催予定である。

2. 外部資金等

科研費 学術変革領域研究（A）（課題番号21H05222）（令和3年度から令和7年度）の予算にて運用した。

2022年度収入・支出：5,590,000円（直接経費4,300,000円、間接経費1,290,000円）

2023年度収入・支出：5,590,000円（直接経費4,300,000円、間接経費1,290,000円）

次年度以降の内定額

2024年度5,590,000円（直接経費4,300,000円、間接経費1,290,000円）

2025年度5,980,000円（直接経費4,600,000円、間接経費1,380,000円）

